

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE SISTEMAS GRANULARES:
APLICAÇÃO DOS MÉTODOS DE MONTE CARLO
E DE ELEMENTOS DISTINTOS**

Charles Rubber de Almeida Abreu

Escola de Química / UFRJ – D. Sc.

Orientadores:

Prof. Marcelo Castier, Ph. D.

Prof. Frederico W. Tavares, D. Sc.

Rio de Janeiro

2004

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE SISTEMAS GRANULARES:
APLICAÇÃO DOS MÉTODOS DE MONTE CARLO
E DE ELEMENTOS DISTINTOS**

Charles Rubber de Almeida Abreu

Tese submetida ao corpo docente do curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor.

Aprovada por:

Prof. Frederico W. Tavares, D. Sc. (Orientador)

Prof. Marcelo Castier, Ph. D. (Orientador)

Prof. Affonso Silva Telles, Ph. D.

Prof. Giulio Massarani, Ph. D.

Prof. José Renato Coury, Ph. D.

Prof. Luís Marcelo Marques Tavares, Ph. D.

Prof. Maurício Bezerra de Souza Jr., D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO DE 2004

Abreu, Charles Rubber de Almeida.

Simulação computacional de sistemas granulares: aplicação dos métodos de Monte Carlo e de Elementos Distintos / Charles Rubber de Almeida Abreu. – Rio de Janeiro, 2004.

xviii, 250 f. : il.

Tese (Doutorado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos) – Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, Escola de Química, 2004.

Orientadores: Marcelo Castier e Frederico W. Tavares

1. Sistemas Granulares. 2. Método de Monte Carlo. 3. Método de Elementos Distintos – Teses. I. Castier, Marcelo (Orient.). Tavares, Frederico W. (Orient.). II. Universidade Federal do Rio de Janeiro. Escola de Química. III. Título.

À minha esposa,
Fernanda

AGRADECIMENTOS

À Agência Nacional do Petróleo (ANP), pela bolsa de estudos e taxa de bancada concedidas para a realização desta tese;

Aos meus orientadores e amigos, professores Marcelo Castier e Frederico Tavares, pela assistência em todos os aspectos deste trabalho e, principalmente, pela incomensurável participação na minha formação acadêmica;

Ao grande mestre, Prof. Affonso Silva Telles, por todos os favores prestados à pós-graduação e à pesquisa científica em Engenharia Química no Brasil e, de modo particular, por sua generosa atenção e seus valiosos ensinamentos;

Aos “pronexianos”, de ontem e de hoje, Rogério Espósito, Amílcar, Fabrício, Heloísa, Leandro e Rogério Navarro, Vladimir, Papa, Marcelo e Nairalice, e ao “pronexiano honorário” Rodrigo, pela valorosa amizade, e por me proporcionarem um excelente ambiente de trabalho;

Aos professores, funcionários e colegas da Escola de Química/UFRJ, que há dez anos (completados no dia 7 de março de 2004) fazem parte do meu cotidiano;

Aos meus grandes amigos, Marcos, Ricardo, Paula e Welbert, pela verdadeira e incondicional amizade e pela assídua presença, seja ela física ou emocional;

À minha irmã e ao meu cunhado, Elizane e Jandirlei, pelo apoio e amizade inestimáveis e, em especial, pelo gentil acolhimento no período final deste trabalho;

À minha mãe, Ceila, pelo inefável amor dedicado aos seus filhos e pelo constante incentivo às minhas escolhas e decisões;

À minha esposa, Fernanda, por sua agradabilíssima companhia, por seu carinho e sua compreensão, e pelo amor que faz de mim um bem-aventurado.

RESUMO

ABREU, Charles Rubber de Almeida. **Simulação Computacional de Sistemas Granulares: Aplicação dos Métodos de Monte Carlo e de Elementos Distintos**; Orientadores: Marcelo Castier e Frederico W. Tavares. Rio de Janeiro: UFRJ/Escola de Química / UFRJ, 2004. Tese (Doutorado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos)

Nas últimas décadas, a simulação computacional tem se mostrado uma ferramenta muito útil no estudo do comportamento de sistemas granulares. Incluída neste contexto, a presente tese se divide em duas partes. Na primeira, desenvolve-se uma metodologia para aplicação do Método de Monte Carlo ao estudo de sistemas constituídos por partículas granulares esferocilíndricas. Com isto, obtêm-se resultados inéditos sobre a compactação de leitos monodispersos, mostrando que há esferocilindros que formam leitos aleatórios mais compactos que aqueles constituídos por esferas, e sobre a segregação de misturas binárias, sugerindo que misturas de partículas de mesmo volume, mas diferentes formatos, podem segregar quando submetidas a vibrações mecânicas. Na segunda parte da tese, busca-se desenvolver uma formulação para o Método de Elementos Distintos (DEM), cuja finalidade é descrever as trajetórias de todas as partículas de um sistema. Embora grande parte dos autores se valha de modelos em duas dimensões, consideram-se, aqui, sistemas tridimensionais formados por partículas esféricas. Adicionalmente, propõem-se melhorias na solução das equações do movimento das partículas. Resultados obtidos sobre a compactação de leitos monodispersos confirmam que vibrações de baixa amplitude e alta frequência podem aumentar a sua densidade de compactação. Estudos sobre misturas binárias de partículas de diferentes tamanhos mostram que acréscimos na amplitude ou na aceleração máxima das vibrações resultam em aumentos na taxa de segregação. Simulações da descarga de recipientes cilíndricos indicam que fundos em formato cônico podem ser usados para evitar fluxos de partículas afunilados, e que aumentos no ângulo entre as paredes de fundo e a horizontal levam a maiores taxas de descarga. Por fim, em uma investigação

sobre a descarga de recipientes planos, reproduz-se uma inversão no perfil de escoamento provocada por vibrações mecânicas horizontais, tal como observada experimentalmente por outros autores. Em tal estudo, demonstra-se a importância de se considerar uma abordagem tridimensional em simulações realizadas com o DEM.

ABSTRACT

ABREU, Charles Rubber de Almeida. **Simulação Computacional de Sistemas Granulares: Aplicação dos Métodos de Monte Carlo e de Elementos Distintos**; Orientadores: Marcelo Castier e Frederico W. Tavares. Rio de Janeiro: UFRJ/Escola de Química / UFRJ, 2004. Tese (Doutorado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos)

During the last decades, computer simulation has shown to be a very useful tool for studying the behavior of granular systems. Included in this framework, the present thesis is divided in two parts. In the first one, a methodology is developed for applying the Monte Carlo Method to the study of granular systems composed of spherocylindrical particles. Thus, novel results are obtained for the packing of monodispersed particles, showing that some spherocylinders can produce denser beds than those formed with spheres, and for the segregation of binary mixtures, suggesting that particles with equal volume, but with different shapes, can segregate when subjected to mechanical vibration. The second part of the thesis provides a formulation of the Distinct Element Method (DEM), whose objective is the description of the trajectory of every particle of a system. Although most authors take advantage of two-dimensional formulations, three-dimensional granular systems of spherical particles are considered in this work. Additionally, some modifications in the method for solving the equations of motion are proposed. Results obtained for the packing of monodispersed beds confirm that low amplitude, high frequency vibrations can increase the density of a packed bed. Studies concerning binary mixtures of differently sized particles show that larger amplitudes or larger frequencies of the vibrations increase the segregation rate. Simulations of the discharge of cylindrical containers indicate that bottom walls with conical shape can be used for avoiding funnel-like particle flows, and that an increase in the angle between the bottom wall and the horizontal plane leads to larger particle discharge rate. Finally, evaluating the discharge of flat containers, an inversion in the flow pattern due to horizontal vibrations is detected, such as experimentally observed by

other authors. Such study demonstrates the importance of three-dimensional approaches in simulations with the DEM.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

- Figura 3.1.1 – Um esferocilindro. (p. 30)
- Figura 3.2.1 – Esquema para caracterização de uma partícula esferocilíndrica. (p. 32)
- Figura 3.4.1 – Esquema de um sistema com condições de contorno periódicas apenas na direção ortogonal ao campo gravitacional. (p. 41)
- Figura 3.4.2 – Esquema para detecção de interpenetração entre uma partícula e as paredes de topo e fundo de um recipiente. (p. 42)
- Figura 3.4.3 – Esquema de uma caixa de simulação cilíndrica. (p. 44)
- Figura 3.4.4 – Contato entre uma partícula e a parede lateral de uma caixa cilíndrica. (p. 45)
- Figura 3.4.5 – Exemplo bidimensional de contato entre duas partículas esferocilíndricas. (p. 47)
- Figura 3.4.6 – Exemplo tridimensional de contato entre duas partículas esferocilíndricas. (p. 48)
- Figura 3.4.7 – Esquema para cálculo da distância mínima entre hastes paralelas. (p. 50)
- Figura 3.4.8 – Algoritmo para cálculo do quadrado da distância mínima entre as hastes de dois esferocilindros. (p. 52)
- Figura 3.5.1 – Divisões para cálculo dos perfis axial e radial de frações locais de vazios. (p. 54)
- Figura 3.5.2 – Divisão para cálculo do perfil cilíndrico de frações locais de vazios. (p. 55)
- Figura 3.5.3 – Cálculo da fração de vazios considerando-se apenas uma fração do leito. (p. 58)
- Figura 3.5.4 – Exemplo de corte horizontal em um leito de esferocilindros confinado em uma caixa cilíndrica. (p. 61)
- Figura 4.2.1 – Imagens tridimensionais de leitos monodispersos simulados. (p. 77)
- Figura 4.2.2 – Fração global de vazios em função da fração de amostragem do leito. (p. 79)
- Figura 4.2.3 – Fração global de vazios média de leitos monodispersos de esferocilindros como função da razão de alongamento das partículas. (p. 80)

Figura 4.2.4 – Distância média das partículas à parede de fundo calculada ao final de cada ciclo de vibração (médias de 10 simulações). (p. 81)

Figura 4.2.5 – Influência da tolerância ξ sobre o cálculo do número médio de contatos por partícula (número de coordenação). (p. 83)

Figura 4.2.6 – Número médio de contatos por partícula esferocilíndrica em leitos monodispersos simulados. (p. 85)

Figura 4.2.7 – Perfis individuais e médios de frações de vazios nas direções axial e radial ($\varphi = 0$ e $A_{\text{vib}} = 2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$). (p. 88)

Figura 4.2.8 – Comparação entre os perfis radiais médios de fração de vazios de diferentes sistemas. (p. 89)

Figura 4.3.1 – Evolução da segregação de misturas binárias de esferocilindros com igual volume e densidade, mas diferentes razões de alongamento. (p. 94)

Figura 4.3.2 – Imagens tridimensionais das misturas (I) e (III) (Tabela 4.3.1) após 1500 ciclos de vibração (sistemas com condições de contorno periódicas nas laterais). (p. 94)

Figura 4.3.3 – Evolução da segregação de misturas binárias de esferas e esferocilindros com $\varphi = 2,66$ de mesmo volume. (p. 96)

Figura 4.3.4 – Comparação entre o efeitos de forma e tamanho sobre a segregação de misturas binárias de esferas e esferocilindros com $\varphi = 0,5$. (p. 97)

Figura 4.3.5 – Comparação entre o efeitos de forma e tamanho sobre a segregação de misturas binárias de esferas e esferocilindros com $\varphi = 3,5$. (p. 98)

Figura 4.3.6 – Imagens tridimensionais de misturas binárias entre esferas e esferocilindros de volumes distintos, após 1000 ciclos de vibração. (p. 99)

Figura 5.5.1 – Esquema para cálculo da interpenetração entre partículas esféricas. (p. 115)

Figura 5.5.2 – Modelo do tipo “mola” para força elástica normal. (p. 116)

- Figura 5.5.3 – Modelo do tipo “mola-pistão” (*spring-dashpot*) para força normal. (p. 119)
- Figura 5.5.4 – Força calculada através do modelo “mola-pistão” durante a colisão de um par isolado com coeficiente de restituição igual a 0,6. (p. 121)
- Figura 5.6.1 – Ponto de contato na interação entre partícula e obstáculo. (p. 131)
- Figura 5.6.2 – Geometria de um obstáculo plano. (p. 132)
- Figura 5.6.3 – Esquemas para cálculo de $\mathbf{r}_k^{(c,i)}$ em obstáculos planos. (p. 133)
- Figura 5.6.4 – Geometria de um obstáculo cônico. (p. 135)
- Figura 5.6.5 – Esquema para cálculo de $\mathbf{r}_k^{(c,i)}$ em obstáculos cônicos. (p. 136)
- Figura 5.8.1 – Modelo com duas molas para força elástica normal. (p. 147)
- Figura 5.8.2 – Estrutura de dados para armazenar propriedades de pares em contato. (p. 148)
- Figura 5.8.3 – Rompimento do contato e da condição de vizinhança entre duas partículas em um mesmo passo de integração. (p. 150)
- Figura 6.2.1 – Altura máxima atingida por uma partícula após choques supostamente conservativos com uma parede horizontal, para diferentes valores de Φ . (p. 156)
- Figura 6.3.1 – Comparação entre leitos compactos de esferas obtidos por diferentes métodos de simulação. (p. 160)
- Figura 6.3.2 – Leito de esferas obtidos após 30 s de vibração mecânica com $A_{\text{vib}}/d = 0,1$ e $\Gamma = 10$. (p. 161)
- Figura 6.3.3 – Perfis radiais de frações locais de vazios dos leitos obtidos antes e após um processo de agitação mecânica. (p. 163)
- Figura 6.4.1 – Estudo da segregação de misturas binárias submetidas a vibrações mecânicas de mesma aceleração relativa, mas de amplitudes distintas. (p. 165)

- Figura 6.4.2 – Configurações correspondentes às simulações de misturas binárias sujeitas a vibrações com $\Gamma = 2$ e diferentes amplitudes. (p. 165)
- Figura 6.4.3 – Estudo da segregação de misturas binárias submetidas a vibrações mecânicas de mesma amplitude, mas de acelerações relativas distintas. (p. 168)
- Figura 6.4.4 – Configurações correspondentes às simulações de misturas binárias sujeitas a vibrações com $A_{\text{vib}} = 0,01 \text{ m}$ e diferentes acelerações relativas. (p. 168)
- Figura 6.5.1 – Imagens tridimensionais de configurações instantâneas oriundas da simulação do escoamento gravitacional em um silo. (p. 170)
- Figura 6.5.2 – Imagens tridimensionais de configurações oriundas da simulação do escoamento em um silo, ocultando-se uma fração das partículas simuladas. (p. 171)
- Figura 6.5.3 – Caracterização geométrica de um silo com fundo cônico. (p. 172)
- Figura 6.5.4 – Imagens tridimensionais de configurações oriundas da simulação do escoamento em um silo com ângulo de inclinação de 30° . (p. 173)
- Figura 6.5.5 – Imagens tridimensionais de configurações oriundas da simulação do escoamento em um silo com ângulo de inclinação de 45° . (p. 174)
- Figura 6.5.6 – Imagens tridimensionais de configurações oriundas da simulação do escoamento em um silo com ângulo de inclinação de 60° . (p. 174)
- Figura 6.5.7 – Evolução temporal do número de partículas no interior de cada silo com orifício de diâmetro igual a 0,05 m. (p. 176)
- Figura 6.5.9 – Vista inferior da abóbada espontaneamente formada durante a descarga de um silo com orifício de diâmetro igual a 0,04 m. (p. 177)
- Figura 6.6.1 – Esquema de um recipiente plano para descarga de partículas, tal como o utilizado no trabalho de Hunt *et al.* (1999). (p. 178)
- Figura 6.6.2 – Fotografias de um processo de descarga realizado em um recipiente plano sem vibração mecânica (Hunt *et al.*, 1999). (p. 179)

Figura 6.6.3 – Fotografias de um processo de descarga realizado em um recipiente plano horizontalmente vibrado com $f_{\text{vib}} = 20 \text{ Hz}$ e $\Gamma = 2$ (Hunt *et al.*, 1999). (p. 180)

Figura 6.6.4 – Simulação bidimensional da descarga de partículas a partir de um recipiente plano imóvel. (p. 182)

Figura 6.6.5 – Simulação bidimensional da descarga de partículas a partir de um recipiente plano sob vibração horizontal com $f_{\text{vib}} = 20 \text{ Hz}$ e $\Gamma = 2$. (p. 183)

Figura 6.6.6 – Simulação tridimensional da descarga de partículas a partir de um recipiente plano imóvel. (p. 185)

Figura 6.6.7 – Simulação bidimensional da descarga de partículas a partir de um recipiente plano sob vibração horizontal com $f_{\text{vib}} = 20 \text{ Hz}$ e $\Gamma = 10$. (p. 186)

Figura A.1 – Visualização dos parâmetros geométricos. (p. 209)

Figura A.2 – Critério para discriminação dos pontos de interseção entre a circunferência e a seção cilíndrica do esferocilindro. (p. 211)

Figura A.3 – Valores do parâmetro θ em função da variável ϕ . (p. 214)

Figura A.4 – Critério para discriminação dos pontos de interseção entre a circunferência e superfície hemisférica da extremidade positiva do esferocilindro. (p. 219)

Figura A.5 – Critério para discriminação dos pontos de interseção entre a circunferência e superfície hemisférica da extremidade negativa do esferocilindro. (p. 224)

Figura A.6 – Relação entre arcos e regiões de interseção para $N_{\theta} = 2$. (p. 227)

Figura A.7 – Relação entre arcos e regiões de interseção para $N_{\theta} = 4$. (p. 228)

Figura A.8 – Relação entre arcos e regiões de interseção para $N_{\theta} = 4$ quando $\pi \in \Theta$. (p. 230)

Figura A.1 – Fluxograma do algoritmo para o cálculo do comprimento da interseção entre um esferocilindro e uma circunferência horizontal. (p. 210)

Figura B.1 – Esquema para cálculo da área da seção reta de uma partícula em uma coordenada z . (p. 240)

LISTA DE TABELAS

- Tabela 4.2.1 – Parâmetros geométricos das partículas simuladas. (p. 75)
- Tabela 4.2.2 – Frações globais de vazios calculadas para os sistemas simulados. (p. 79)
- Tabela 4.2.3 – Número médio de contatos por partícula nos leitos simulados. (p. 84)
- Tabela 4.3.1 – Misturas binárias para estudo de segregação. (p. 93)
- Tabela 5.1 – Parâmetros invariáveis nas simulações do empacotamento de esferas em recipientes cilíndricos. (p. 99)
- Tabela 5.2 – Dados referentes às simulações do empacotamento de esferas em cilindros. (p. 103)
- Tabela 5.3 – Dados referentes às simulações do empacotamento de esferas em recipientes cônicos. (p. 111)
- Tabela 6.2.1 – Parâmetros comuns a todas as simulações. (p. 156)
- Tabela 6.5.1 – Vazões através dos orifícios dos diferentes silos simulados. (p. 175)

SUMÁRIO

| | |
|--|-----|
| Capítulo 1 – Introdução | 01 |
| Capítulo 2 – Revisão Bibliográfica | 10 |
| 2.1 – Introdução | 10 |
| 2.2 – Simulação Atemporal de Sistemas Granulares | 11 |
| 2.3 – Simulação Dinâmica de Sistemas Granulares | 17 |
| Capítulo 3 – Método de Monte Carlo Aplicado a Sistemas Granulares de Partículas | |
| Rígidas Não-Esféricas | 27 |
| 3.1 – Introdução | 27 |
| 3.2 – Caracterização de um Sistema de Partículas Esferocilíndricas | 31 |
| 3.3 – Aplicação do Método de Monte Carlo a Sistemas de Esferocilindros | |
| Rígidos | 33 |
| 3.4 – Detecção de Interpenetrações | 40 |
| 3.4.1 – Interação entre uma Partícula e as Paredes de um Recipiente . | 40 |
| 3.4.2 – Interação entre Duas Partículas | 46 |
| 3.5 – Propriedades Estruturais de Leitos de Partículas Esferocilíndricas | 52 |
| 3.5.1 – Fração Global de Vazios | 56 |
| 3.5.2 – Perfis de Frações Locais de Vazios | 60 |
| 3.5.3 – Número de Coordenação | 67 |
| 3.6 – Simulação de Monte Carlo de Sistemas Granulares | 69 |
| Capítulo 4 – Resultados da Simulação de Sistemas de Partículas Esferocilíndricas ... | 74 |
| 4.1 – Introdução | 74 |
| 4.2 – Sistemas Monodispersos | 74 |
| 4.2.1 – Fração Global de Vazios | 78 |
| 4.2.2 – Número de Coordenação | 83 |
| 4.2.3 – Perfis de Frações Locais de Vazios | 85 |
| 4.3 – Misturas Binárias | 91 |
| Capítulo 5 – Simulação Dinâmica de Sistemas Granulares | 101 |

| | |
|--|---------|
| 5.1 – O Método de Elementos Distintos | 101 |
| 5.2 – Mecânica de Corpos Rígidos | 103 |
| 5.3 – Determinação das Equações do Movimento | 107 |
| 5.4 – Forças de Campo | 111 |
| 5.5 – Forças de Interação entre Partículas | 112 |
| 5.5.1 – Forças na Direção Normal ao Contato | 113 |
| 5.5.2 – Forças na Direção Tangencial ao Contato | 122 |
| 5.5.3 – Digressão a Respeito de Modelos de Força de Interação | 127 |
| 5.6 – Forças de Interação com Obstáculos | 129 |
| 5.6.1 – Obstáculos Planos | 132 |
| 5.6.2 – Obstáculos Cônicos | 135 |
| 5.7 – Solução das Equações do Movimento | 139 |
| 5.8 – Implementação Computacional | 144 |
| Capítulo 6 – Resultados da Simulação de Sistemas Granulares Usando-se o Método de Elementos Distintos | 154 |
| 6.1 – Determinação de Parâmetros | 154 |
| 6.2 – Determinação de Parâmetros | 154 |
| 6.3 – Formação de Leitos Monodispersos de Esferas | 158 |
| 6.4 – Segregação por Diferenças de Tamanho em Misturas Binárias | 164 |
| 6.5 – Escoamento de Materiais Granulares em Silos e Tremonhas | 169 |
| 6.6 – Efeito de Vibrações Horizontais sobre a Descarga de Silos e Tremonhas | 178 |
| Capítulo 7 – Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros | 186 |
| 7.1 – Conclusões | 186 |
| 7.2 – Sugestões para Trabalhos Futuros | 190 |
| Referências Bibliográficas | 191 |
| Apêndice A – Pontos de Interseção entre Duas Circunferências | 207 |

| | |
|--|-----|
| A.1 – Introdução | 207 |
| A.2 – Pontos de Interseção entre uma Circunferência e a Seção Cilíndrica de um Esferocilindro | 208 |
| A.3 – Pontos de Interseção entre uma Circunferência e o Hemisfério da Extremidade Positiva de um Esferocilindro | 217 |
| A.4 – Pontos de Interseção entre uma Circunferência e o Hemisfério da Extremidade Negativa de um Esferocilindro | 222 |
| A.5 – Comprimento da Interseção entre uma Circunferência e um Esferocilindro | 226 |
| A.6 – Considerações Finais | 231 |
| Apêndice B – Modelagem Simplificada do Método de Elementos Distintos para Sistemas Sólido-Fluido | 236 |
| B.1 – Introdução | 236 |
| B.2 – Determinação do Perfil de Velocidades do Fluido | 238 |
| B.3 – Cálculo da Força de Arrasto | 244 |
| Apêndice C – Solução da Colisão Frontal entre Duas Partículas Isoladas | 247 |